ภาคผนวก

มหาวิทยาลัยบูรพา
Burapha University

ภาคผนวก ก

การคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ (Lattice Constants) และขนาดผลึก (Crystallite Size)

มหาวิทยาลัยบูรพา
Burapha University

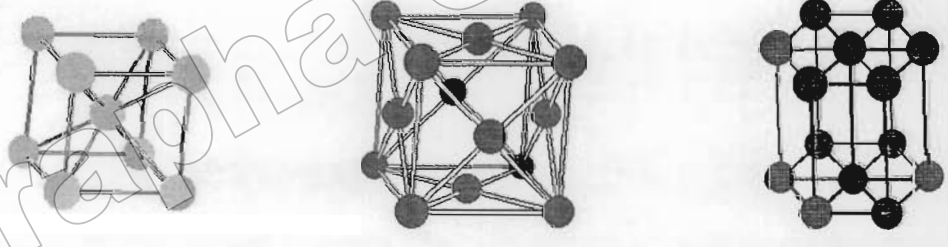
การคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ (Lattice Constants)

แลตทิซ ผลึกและหน่วยเซลล์

วัสดุต่าง ๆ มีโครงสร้างภายในแตกต่างกัน ทั้งนี้ขึ้นกับรูปแบบการจัดอะตอมหรือไอออนในโครงสร้าง ถ้าอะตอมหรือไอออนในโครงสร้าง ถ้าอะตอมไอออนมีรูปแบบเฉพาะของการจัดตัวและซ้ำรูปแบบนั้นอย่างสม่ำเสมอทั้ง 3 มิติ ก็จะได้ โครงสร้างผลึก (Crystal Structure) วัสดุที่มีโครงสร้างผลึก ได้แก่ เซรามิกส์ โลหะ และโลหะผสมชนิดต่าง ๆ ในสภาพของแข็ง เป็นต้น ความหมายของผลึกอธิบายโดยง่าย

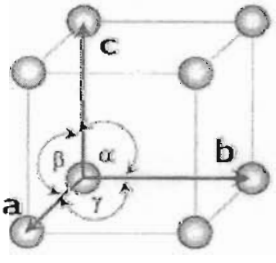
ผลึก (Crystal) = แลตทิซ (Lattice) + อะตอมมูลฐาน (Basic Atom)

แลตทิซ คือ โครงข่าย 3 มิติ จุดตัดของโครงข่าย เรียกว่า จุดแลตทิซ (Lattice Point) สิ่งที่อยู่รอบจุดแลตทิซทุกจุดจะเหมือนกัน ตำแหน่งที่เป็นจุดแลตทิซ 1 จุด แทนอะตอม 1 อะตอม และเรียกอะตอมทั้งหมดที่อยู่ในโครงข่ายว่าอะตอมมูลฐาน ดังนั้น ผลึก ก็คือแลตทิซ ที่มีอะตอมเข้าไปอยู่อย่างสม่ำเสมอในรูปแบบใดรูปแบบหนึ่ง การซ้ำกันภายในหน่วยแลตทิซทำให้สามารถแบ่งแลตทิซออกเป็นหน่วยย่อยได้ หน่วยย่อยที่เล็กที่สุดที่ยังคงมีรูปแบบและสมบัติเช่นเดียวกันกับผลึกเรียกว่า หน่วยเซลล์ (Unit Cell) สำหรับค่าคงที่แลตทิซ (Lattice Constant) ของหน่วยเซลล์ บอกถึงขนาดและรูปร่างของหน่วยเซลล์นั้น



Body Centered Cubic; BCC Face Centered Cubic; FCC Hexagonal Close Packed; HCP

ภาพที่ ก-1 หน่วยเซลล์แบบต่าง ๆ



$\vec{a}, \vec{b}$, และ $\vec{c}$ เป็นเวกเตอร์ของหน่วยเซลล์
มีหน่วยเป็นอังสตอม (Å) โดยที่ 1 Angstom = 10^{-10}m.
α, β, γ เป็นมุมระหว่างเวกเตอร์

ภาพที่ ก-2 ค่าคงที่แลตทิซของหน่วยเซลล์

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

ระบบผลึกและแลตทิซบราเวส์

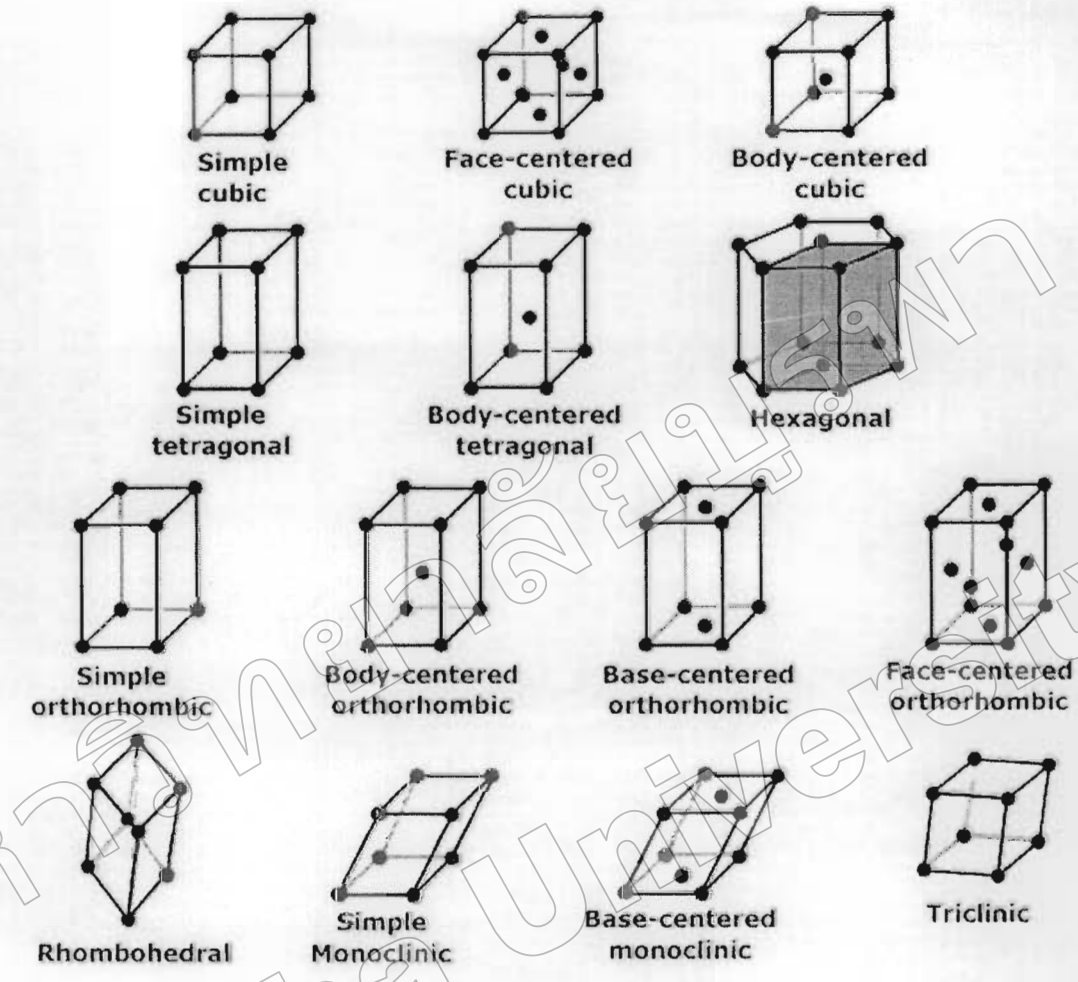
หน่วยเซลล์ของผลึกต่างชนิดกันมีค่าคงที่แลตทิซคนละชุดกัน จารกค่าที่เป็นไปได้ทั้งหมดของค่าคงที่แลตทิซ ทำให้จัดระบบผลึกได้ 7 ระบบ (ตารางที่ 1)

ตารางที่ ก-1 ระบบผลึกและค่าคงที่แลตทิซ

ระบบผลึก	แกน	มุมระหว่างแกน
คิวบิค	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
เตตระโกนอล	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
ออร์โธรอมบิก	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^o$
โมโนคลินิก	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^o, \beta \neq 90^o$
ไตรคลินิก	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^o$
เฮกซะโกนอล	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^o, \gamma = 120^o$
รอมโบฮีดรัล	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^o$

ที่มา: Van Vlack, L.H., 1980, หน้า 73

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University



ภาพที่ ก-3 หน่วยเซลล์ 14 แบบในแลตทิซบราเวส์

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

สูตรคำนวณระยะห่างระหว่างระนาบในระบบผลึกแบบต่าง ๆ

คิวบิค (Cubic) :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2} \qquad \text{(ก-1)}$$

เตตระโกนอล (Tetragonal) :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \qquad \text{(ก-2)}$$

ออร์โธรอมบิก (Orthorhombic) :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \qquad \text{(ก-3)}$$

เฮกซะโกนอล (Hexagonal) :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2}\right) + \frac{l^2}{c^2} \qquad \text{(ก-4)}$$

รอมโบฮีดรัล (Rhombohedral) :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{\left(h^2 + k^2 + l^2\right)\sin^2\alpha + 2\left(hk + kl + hl\right)\left(\cos^2 - \cos\alpha\right)}{a^2\left(1 - 3\cos^2\alpha + 2\cos^3\alpha\right)} \qquad \text{(ก-5)}$$

โมโนคลินิก (Monoclinic) :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{\sin^2\beta}\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2\sin^2\beta}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl\cos\beta}{ac}\right) \qquad \text{(ก-6)}$$

ไตรคลินิก (Triclinic) :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{1}{V^2}\left(S_{11}h^2 + S_{22}k^2 + S_{33}l^2 + 2S_{12}hk + 2S_{23}kl + 2S_{13}hl\right) \qquad \text{(ก-7)}$$

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

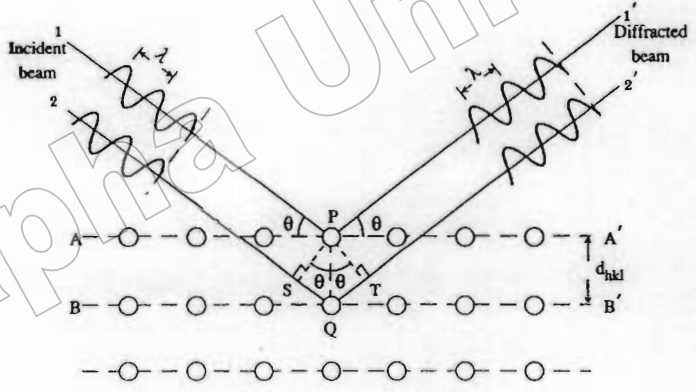
สำหรับสมการของระบบไตรคลินิก ตัวแปรต่าง ๆ มีความสัมพันธ์กับแลตทิซพารามิเตอร์ดังนี้

$$V = abc\sqrt{1-\cos^2\alpha-\cos^2\beta-\cos^2\gamma+2\cos\alpha\cos\beta\cos\gamma} \quad \text{(ปริมาตรของหน่วยเซลล์)}$$

$$S_{11} = b^2c^2\sin^2\alpha$$
$$S_{22} = a^2c^2\sin^2\beta$$
$$S_{33} = a^2b^2\sin^2\gamma$$
$$S_{12} = abc^2\left(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma\right)$$
$$S_{23} = a^2bc\left(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha\right)$$
$$S_{13} = ab^2c\left(\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta\right)$$

เอกสารอ้างอิง: [Cullity, หน้า 501-502]

<u>กฎของแบรกก์ (Bragg's law)</u>



ภาพที่ ก-4 แบบจำลองการเรียงตัวของอะตอม

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda \qquad \text{(ก-8)}$$

เมื่อ d_{hkl} เป็นระยะห่างระหว่างระนาบผลึก ($h\,k\,l$) (d-spacing)

θ เป็นมุมตกกระทบและมุมสะท้อน เมื่อวัดจากแนวระนาบ (ในหน่วย radians)

n ลำดับการสะท้อน

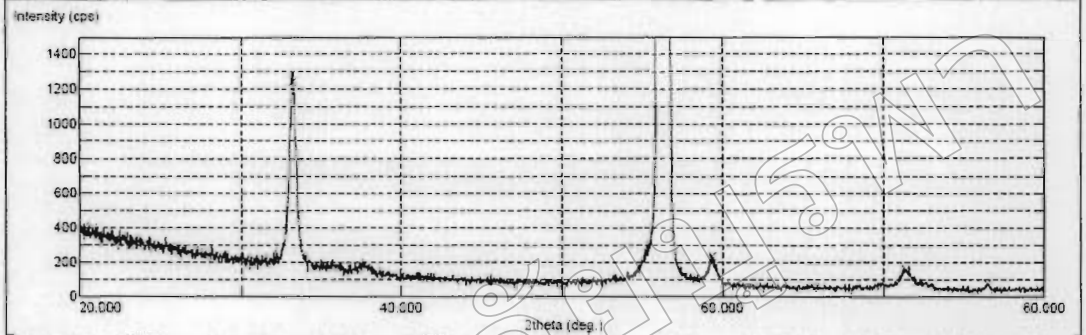
λ ความยาวคลื่น (λ = 1.5406 Å)

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

การคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซของฟิล์มที่มีโครงสร้างแบบเฮกซะโกนอล

Peak Search

Sample	: AlN-1-1-1	File	: AlN-1-1-1.raw	Date	: May-06-10 09:12:44	Operator	: Administrator
Comment	: Sukkaneste-standard	Memo	:				
Method	: 2nd differential	Typical width	: 1.000 deg.	Min. height	: 25.00 cps		



Peak no.	2theta	Flex	Width	d-value	Intensity	I/Io	Peak no.	2theta	Flex	Width	d-value	Intensity	I/Io
1	33.220		0.635	2.6947	1240	1							
2	37.720		0.847	2.3829	175	1							
3	56.400		0.565	1.6300	669.00	100							
4	59.360		0.729	1.5552	238	1							
5	69.840		0.541	1.3456	68	1							
6	71.360		0.624	1.3203	163	1							
7	76.460		0.565	1.2448	93	1							

May-06-2010 09:47:45 Page-3

หมายเหตุ การแปลงมุมองศาเป็นเรเดียน ($1^\circ = \pi/180$ rad)

ตอนที่ 1 การคำนวณหาระยะห่างระหว่างระนาบผลึก (*d*-spacing)

วิธีทำ จากสมการที่ (ก-8) จะได้ $d_{hkl} = \dfrac{n\lambda}{2\sin\theta}$

ที่ระนาบ (100); $d_{100} = \dfrac{1.5406\ \text{Å}}{2\sin(33.22^o)}$

$d_{100} = 2.6947\ \text{Å}$

ที่ระนาบ (101); $d_{101} = \dfrac{1.5406\ \text{Å}}{2\sin(37.72^o)}$

$d_{101} = 2.3829\ \text{Å}$

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

ตอนที่ 2 การคำนวณหาค่าคงที่แลตทิซ (Lattice Constants)

นำระยะห่างระหว่างระนาบผลึกจากตอนที่ 1 และ $h\ k\ l$ ไปแทนในสมการที่ (ก-2)

วิธีทำ จากสมการที่ (ก-2) $$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)+\frac{l^2}{c^2}$$

ที่ระนาบ (100); $$\frac{1}{(2.6947)^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{1}{a^2}\right)$$

ดังนั้น $$a = 3.112 \text{ Å}$$

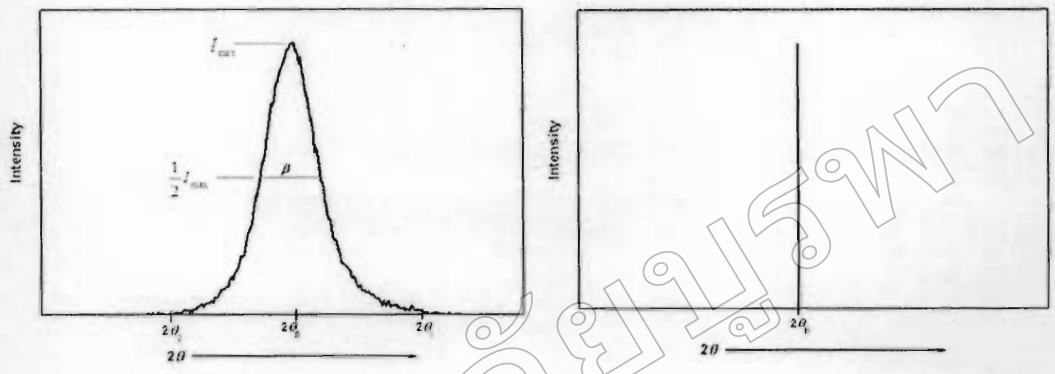
ที่ระนาบ (101); $$\frac{1}{(2.3829)^2} = \frac{4}{3}\left(\frac{2}{a^2}\right)+\frac{1}{c^2}$$

$$\frac{1}{(2.3829)^2} = \frac{8}{3(3.112)^2}+\frac{1}{c^2}$$

ดังนั้น $$c = 5.103 \text{ Å}$$

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

การคำนวณหาขนาดผลึก (Crystallite size)



ภาพที่ ก-5 Effect of crystallite size on diffraction curves (schematic) (Cullity, 1978)

Seherrer Equation $$L = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta_{\beta}} \qquad \text{(ก-9)}$$

เมื่อ L คือ ขนาดของผลึกฟิล์มบางเซอร์โคเนียมออกไซด์ หน่วย นาโนเมตร (nm)

k คือ ค่าคงที่เท่ากับ 0.9

λ คือ ความยาวคลื่นของรังสีเอกซ์ (CuK_{α} = 1.5406 Å)

θ คือ ครึ่งหนึ่งของมุมตรงจุดศูนย์กลางพีค หน่วย เรเดียน

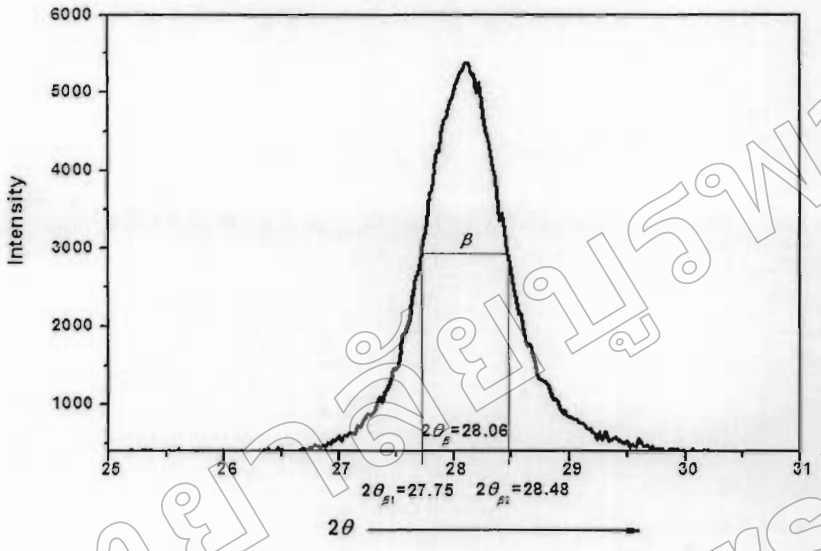
β คือ ความกว้างครึ่งหนึ่งของพีคที่มีค่าความเข้มสูงสุด

(Full width at half maximum; FWHM) ซึ่งคำนวณได้จากสมการ ก-14

$$\beta = \frac{2\theta_{\beta 2} - 2\theta_{\beta 1}}{2} \qquad \text{(ก-10)}$$

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

ตัวอย่าง ก-2 การคำนวณขนาดผลึก



ภาพที่ ก-6 การหาความกว้างครึ่งหนึ่งของพีคที่มีค่าความเข้มสูงสุด

วิธีคำนวณ หาค่า β จากสมการ ก-10

$$\beta = \frac{2\theta_{\beta 2} - 2\theta_{\beta 1}}{2}$$

$$\beta = \frac{33.47 - 32.98}{2} = 0.004 \quad \text{เรเดียน}$$

นำค่า β แทนในสมการ ก-9 จะได้

$$L = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta_{\beta}} \; ; \; \cos\theta_{\beta} = 0.958 \quad \text{เรเดียน}$$

$$L = \frac{(0.9)(0.15406\ nm)}{(0.004)(0.958)} = 34 \quad \text{nm}$$

ดังนั้น ผลึกมีขนาดเท่ากับ 34 nm

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

ภาคผนวก ข

ผลงานวิจัยที่ได้รับการตีพิมพ์เผยแพร่

มหาวิทยาลัยบูรพา
Burapha University

ที่ ศธ 0527.04/ว 161

คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร
อำเภอเมืองฯ พิษณุโลก 65000

3 มีนาคม 2555

เรื่อง แจ้งผลการพิจารณาผลงาน การประชุมวิชาการ "วิทยาศาสตร์วิจัย" ครั้งที่ 4

เรียน นายชัยฤกษ์ ตั้งเฮงเจริญ

ตามที่ท่านได้ส่งผลงานวิจัยเพื่อเข้าร่วมนำเสนอผลงานและ**ตีพิมพ์ใน** Proceedings การประชุมวิชาการ "วิทยาศาสตร์วิจัย" ครั้งที่ 4 ซึ่งจัดระหว่างวันที่ 12-13 มีนาคม 2555 ณ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

ชื่อเรื่อง ผลของความหนาต่อโครงสร้างและสมบัติทางแสงของฟิล์มบางอลูมิเนียมไนไตรด์เคลือบด้วยวิธีรีแอคตีฟดีซีสปัตเตอริง

กลุ่มสาขา สาขาฟิสิกส์ ฟิสิกส์ประยุกต์ ฟิสิกส์เทคโนโลยีอิเล็กทรอนิกส์และพลังงาน วัสดุศาสตร์ และวิทยาศาสตร์ศึกษา

รูปแบบ Oral Presentation

ทางคณะกรรมการฯ ได้พิจารณาผลงานของท่านเรียบร้อยแล้ว โดยมีผลการพิจารณาดังนี้

☐ ทางคณะกรรมการฯ มีความยินดีตอบรับให้ท่านเข้าร่วมนำเสนอผลงานและตีพิมพ์ใน Proceedings โดยไม่มีข้อแก้ไข

☑ ทางคณะกรรมการฯ มีความยินดีตอบรับให้ท่านเข้าร่วมนำเสนอผลงานและตีพิมพ์ใน Proceedings โดยให้ท่านแก้ไขตามข้อคิดเห็นของกรรมการประเมินผลงาน (ดังเอกสารแนบ)

☐ ทางคณะกรรมการฯ ไม่สามารถตอบรับให้ท่านเข้าร่วมนำเสนอผลงานและตีพิมพ์ใน Proceedings

ทั้งนี้ <u>ผลงานวิจัยดังกล่าวจะตีพิมพ์เผยแพร่ใน CD-Proceedings การประชุมวิชาการฯ ภายในเดือนพฤษภาคม 2555</u> จึงเรียนมาเพื่อโปรดทราบ และขอขอบคุณท่านเป็นอย่างยิ่งที่ให้เกียรติส่งผลงานเข้าร่วมการประชุมวิชาการฯ ครั้งนี้

ขอแสดงความนับถือ

(ศาสตราจารย์ ดร.สมยศ พลับเที่ยง)
คณบดีคณะวิทยาศาสตร์

งานบริการการศึกษา หน่วยวิจัย
โทรศัพท์ 0-5596-3171 โทรสาร 0-5596-3145
E-mail : src@nu.ac.th Website : http://sci.nu.ac.th/src/4

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

Abstract

การประชุมวิชาการ "วิทยาศาสตร์วิจัย" ครั้งที่ 4

The 4th Science Research Conference

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

SRO - P10

ผลของความหนาต่อโครงสร้างและสมบัติทางแสงของฟิล์มบางอลูมิเนียมไนไตรด์เคลือบด้วยวิธีรีแอคตีฟดีซีสปัตเตอริง

Effect of Thickness on Structural and Optical Properties of AlN Thin Films Deposited by Reactive DC Sputtering

ชัยฉกษ์ ตั้งเฮงเจริญ,[1,3] นิรันดร์ วิทิตอนันต์,[1,3*] อรรถพล เชยคุภเกตุ,[1,3] รัติกาล มานพ,[2] และ สุรสิงห์ ไชยคุณ[1,3]
Chailock Tanghengjaroen,[1,3] Nirun Witit-anun,[1,3*] Attapol Choeysuppakat,[1,3] Rattikarn Manop,[2] and Surasing Chaiyakun[1,3]

[1]ห้องปฏิบัติการวิจัยพลาสมาสำหรับวิทยาศาสตร์พื้นผิว ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยบูรพา จ.ชลบุรี
[2] คณะวิทยาศาสตร์ ศรีราชา มหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ วิทยาเขตศรีราชา จ.ชลบุรี
[3]ศูนย์ความเป็นเลิศด้านฟิสิกส์ (ThEP) สำนักพัฒนาบัณฑิตศึกษาและวิจัยด้านวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี สกอ. จ.กรุงเทพฯ

บทคัดย่อ

ฟิล์มบางอลูมิเนียมไนไตรด์ (AlN) เคลือบบนกระจกสไลด์และแผ่นซิลิกอนด้วยวิธีรีแอคตีฟดีซีแมกนีตรอนสปัตเตอริง เพื่อศึกษาผลของความหนาต่อโครงสร้างและสมบัติทางแสง ฟิล์มบางที่เคลือบได้นำไปศึกษาลักษณะเฉพาะด้วย Grazing-incidence X-ray diffraction (GIXRD), Atomic force microscopy (AFM) และ ค่าการส่งผ่านแสงตามลำดับ ผลการศึกษาพบว่าฟิล์มที่เคลือบได้มีลักษณะใส ส่งผ่านแสงช่วงตามองเห็นสูง โครงสร้างผลึกจากผล XRD พบว่าฟิล์มที่เคลือบได้มีโครงสร้างแบบอสัณฐานเมื่อฟิล์มมีความหนาน้อย และเริ่มเป็นผลึกเมื่อความหนาฟิล์มเพิ่มขึ้น โดยมีโครงสร้างผลึกตรงกับ AlN(100) AlN(101) และ AlN(110) ส่วนความหยาบผิว (R_a) และความหนาฟิล์มจากผล AFM พบว่ามีค่าอยู่ในช่วง 0.2 nm ถึง 2.1 nm และ 121 nm ถึง 656 nm ตามลำดับ ค่าคงที่ทางแสงได้แก่ ค่าดัชนีหักเห (n) และ ค่าสัมประสิทธิ์การดับสูญ (k) ซึ่งคำนวณจากสเปคตรัมการส่งผ่านแสงในช่วงตามองเห็นด้วยวิธี Envelope ที่ความยาวคลื่น 600 nm พบว่า ค่า n และ ค่า k มีค่าอยู่ในช่วง 1.85-1.97 และ 0.018-0.007 ตามลำดับ

คำสำคัญ: ค่าคงที่แสง/ ฟิล์มบางอลูมิเนียมไนไตรด์/ ดีซีสปัตเตอริง

Abstract

Aluminum nitride (AlN) thin films have been deposited on glass slide and Si-wafer by reactive DC magnetron sputtering method. Effect of film's thickness on structure and optical properties was investigated. The as-deposited films have been characterized by grazing-incidence X-ray diffraction (GIXRD), atomic force microscopy (AFM) and optical transmittance, respectively. The results show that the as-deposited films were transparent and have high transmittance in visible regions. The crystal structure from XRD results show that the as-deposited films is amorphous with low thicknesses and turn to be crystal structure when increases thickness, which corresponding to the AlN(100), AlN(101), and AlN(110). The roughness (R_a) and the films thickness from AFM was varied from 0.2 nm to 2.1 nm and 121 nm to 656 nm, respectively. The optical constants namely refractive index n and extinction coefficient k, were determined from transmittance spectrum in the visible regions by using envelope method. For 600 nm, n and k, were in the range of 1.85-1.97 and 0.018-0.007 respectively.

Keyword: Optical constant/ AlN thin films/ DC sputtering

*Corresponding author. E-mail: nirun@buu.ac.th

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University

มหาวิทยาลัยนเรศวร มหาวิทยาลัยบูรพา มหาวิทยาลัยพะเยา

วิทยาศาสตร์วิจัย ครั้งที่ 4

The 4th Science Research Conference

การประชุมวิชาการระดับชาติ "วิทยาศาสตร์วิจัย" ครั้งที่ 4

ขอรับรองว่า

ชัยฤกษ์ ตั้งเฮงเจริญ

ได้นำเสนอผลงานรูปแบบบรรยาย

เรื่อง

ผลของความหนาต่อโครงสร้างและสมบัติทางแสงของฟิล์มบางอลูมิเนียมไนไตรด์
เคลือบด้วยวิธีรีแอคตีฟดีซีสปัตเตอริง

ในระหว่างวันที่ 12 - 13 มีนาคม 2555
ณ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยนเรศวร

(ศาสตราจารย์ ดร.สุจินต์ จินายน)
อธิการบดีมหาวิทยาลัยนเรศวร

มหาวิทยาลัยบูรพา Burapha University